



TITLE:

遍歴電子系に於ける電子-マグノン相互作用に起因した結合定数のくりこみの自己無撞着な計算

AUTHOR(S):

関, 誠一; 下平, 孟

CITATION:

関, 誠一 ...[et al]. 遍歴電子系に於ける電子-マグノン相互作用に起因した結合定数のくりこみの自己無撞着な計算. 物性研究 1985, 44(1): 295-299

ISSUE DATE:

1985-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91555>

RIGHT:

遍歴電子系に於ける電子-マグノン 相互作用に起因した結合定数の くりこみの自己無撞着な計算

埼玉大・理 関 誠一, 下平 孟

(1985年1月8日受理)

要 旨

電子-マグノン相互作用による電子間クーロン斥力の結合定数のくりこみを考察する。相互作用によって電子及びマグノンの状態が変化し、この変化が相互作用効果それ自身に跳返ることを考慮してくりこまれた結合定数を求める。

§1 はじめに

遍歴電子系に於ける電子-マグノン相互作用は電子間クーロン相互作用の結合定数、電子質量、ストナーギャップ、マグノンのスティフネス定数など種々の物理量のくりこみ効果に対して極めて重要な働きをする¹⁾。電子-マグノン相互作用による電子、マグノン状態の変化は相互作用それ自身に跳返る。従ってこれらのくりこみ効果は互いに密接に関連しており、くりこみの程度を評価するためには物理量間の自己無撞着的な取扱いが必要になる。本論文ではこうした自己無撞着性を考慮して電子-マグノン相互作用を調べ、くりこみ効果のために有効結合定数がくりこみ以前の大きさに比べて著しく小さくなることを指摘する。

§2 定式化と数値計算

電子によるマグノンの放出・吸収過程は次式で表すことができる。

$$S_+(p) = S_+^0(p) + \frac{\lambda}{(2\pi)^2} \int d^4 q S_+(p) \Gamma_3^+(q, p; p+q) S_-(p+q) A_B(q) S_+(p) \quad (1)$$

$$S_-(p) = S_-^0(p) + \frac{\lambda}{(2\pi)^2} \int d^4 q S_-^0(p) \Gamma_3^-(p; q, p-q) S_+(p-q) A_B(q) S_-(p) \quad (2)$$

ここで $S_+(S_-)$ と A_B は上向き (下向き) スピン電子とマグノンのプロパゲータである。 $S_+^0(S_-^0)$ はハートリー・フォック状態での電子プロパゲータであり、 λ は裸の結合定数を表している。

関誠一，下平孟

磁化は電子の上向きスピン方向にあるものとする。結節部分 Γ_3^+ と Γ_3^- に対する運動方程式は

$$\begin{aligned}\Gamma_3^+(q, p; p+q) = & -\lambda + \frac{\lambda}{(2\pi)^4} \int d^4 k r_4^+(q, p; p+q-k, k) A_B(k) S_+(p+q-k) \\ & + \frac{\lambda}{(2\pi)^4} \int d^4 k r_4^-(q, p+k; k, p+q) A_B(k) S_-(p+k)\end{aligned}\quad (3)$$

$$\begin{aligned}\Gamma_3^-(p+q; q, p) = & -\lambda + \frac{\lambda}{(2\pi)^4} \int d^4 k r_4^-(k, p+q; q, p+k) A_B(k) S_-(p+k) \\ & + \frac{\lambda}{(2\pi)^4} \int d^4 k r_4^+(k, p+q-k; q, p) A_B(k) S_+(p+q-k)\end{aligned}\quad (4)$$

で与えられる。²⁾ 但し、 r_4^+ 及び r_4^- は電子-マグノン散乱に対する結節部分である。

相互作用効果を調べる時、理論の座標軸の回転操作に対する不変性に注意することが必要である。このような不変性はいわゆるワード・高橋恒等式（以後 WTI とする）の形式で記述され、WTI は計算の各段階で成立することが要請される。前論文²⁾ で我々は次のような WTI を導出した。

$$\Gamma_3^+(q, p; p+q) = -Mr_4^+(q, p; 0, p+q) = Mr_4^-(q, p; 0, p+q) \quad (5)$$

$$\Gamma_3^-(p+q; q, p) = -Mr_4^+(0, p+q; q, p) = Mr_4^-(0, p+q; q, p). \quad (6)$$

但し、 M は系の磁化を表す。これらの関係を (1) ~ (4) に適用すると、電子の自己エネルギーに対する Hertz-Edwards³⁾ の式

$$\Sigma_+(p) = \Sigma_+^0(p) / [1 + (\Sigma_+^0(p) - \Sigma_-^0(p)) / \lambda M] \quad (7)$$

$$\Sigma_-(p) = \Sigma_-^0(p) / [1 + (\Sigma_+^0(p) - \Sigma_-^0(p)) / \lambda M] \quad (8)$$

が得られる。但し、

$$\Sigma_+^0(p) = \frac{\lambda}{(2\pi)^4} \int d^4 q S_-(p+q) A_B(q) \quad (9)$$

$$\Sigma_-^0(p) = \frac{\lambda}{(2\pi)^4} \int d^4 q S_+(p+q) A_B(q). \quad (10)$$

である。

以下では簡単のため完全強磁性の場合だけに限定して議論を進めよう。この場合、上向きスピン電子は電子-マグノン相互作用による摂動を受けないから $\Sigma_+^0 = 0$ を (8) に代入して

$$\Sigma_-(p) = \Sigma_-^0(p) / [1 - \Sigma_-^0(p) / \lambda M]. \quad (11)$$

が得られる。 Σ_-^0 を計算するためにマグノンのプロパゲータとして次の表式を利用する。

$$A_B(q) = 1/[q_0 - Dq^2] \quad (12)$$

ここで D はマグノンのスティフネス定数であり上向き, 下向きスピン電子状態の両方に依存する。放物線形モデルでは Σ_-^0 の虚部は

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_-^0(p) = & \frac{m\lambda^2}{2|\mathbf{p}|} \int_0^A q dq \theta(-Dq^2 + 2mp_0) \theta(2mp_0 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2 + \mathbf{k}_F^2 - Dq^2) \\ & \times \theta((\mathbf{p} + \mathbf{q})^2 - \mathbf{k}_F^2 + Dq^2 - 2mp_0) \end{aligned} \quad (13)$$

と表される。但し, θ は標準的なステップ関数であり, また A , k_F , m はそれぞれカットオフ, フェルミ運動量, 裸の電子質量である。また Σ_-^0 の実部は

$$\text{Re} \Sigma_-^0(p) = \begin{cases} -\frac{m\lambda^2}{(2\pi)^2|\mathbf{p}|} [I(A; -t_1, t_2) - I(A; t_1, t_2) \\ -I(|\mathbf{p}| + |\mathbf{k}_F|; -t_1, t_2) - I(|\mathbf{p} - \mathbf{k}_F|; -t_1, t_2) \\ + I(|\mathbf{p}| + |\mathbf{k}_F|; 0, -p_0/2mD) - I(|\mathbf{k}_F - \mathbf{p}|; 0, -p_0/2mD)] \\ \quad (\text{for } A > |\mathbf{p}| + |\mathbf{k}_F|) \\ -\frac{m\lambda^2}{(2\pi)^2|\mathbf{p}|} [I(A; 0, -p_0/2mD) - I(A; t_1, t_2) \\ -I(|\mathbf{p} - \mathbf{k}_F|; 0, -p_0/2mD) + I(|\mathbf{p} - \mathbf{k}_F|; -t_1, t_2)] \\ \quad (\text{for } |\mathbf{p} - \mathbf{k}_F| < A < |\mathbf{p}| + |\mathbf{k}_F|) \\ -\frac{m\lambda^2}{(2\pi)^2|\mathbf{p}|} [I(A; -t_1, t_2) - I(A; t_1, t_2)] \theta(|\mathbf{p}| - |\mathbf{k}_F|) \\ \quad (\text{for } 0 < A < |\mathbf{p} - \mathbf{k}_F|) \end{cases} \quad (14)$$

で与えられる。但し,

$$t_1 = |\mathbf{p}|/(2mD + 1), \quad (15)$$

$$t_2 = (\mathbf{p}^2 - \mathbf{k}_F^2 - 2mp_0)/(2mD + 1) \quad (16)$$

であり, 関数 I は次式で定義される。

$$I(x; b, c) = \int_0^x q dq \ln|q^2 + 2bq + c|. \quad (17)$$

下向きスピン電子の摂動を受けた電子分散 $\omega_-(\mathbf{p})$ は

$$[p_c - \varepsilon(\mathbf{p}) - A_{\text{HF}} - \text{Re} \Sigma_-(p_0, \mathbf{p}; A^*)] p_0 = \omega_-(\mathbf{p}) = 0 \quad (18)$$

関誠一，下平孟

により決定される。但し $\varepsilon(\mathbf{p})$ はハートリー・フォック分散である。(18)に於いて Δ_{HF} 及び Δ^* はそれぞれ無摂動，摂動ストナー・ギャップを表しており， $\text{Re}\Sigma_-$ のカッコ内の Δ^* は自己エネルギーの Δ^* 依存性を明確にするために用いられている。 Δ^* は(18)に於いて $\mathbf{p}=0, p_0=\Delta^*$ と置いて求められる。すなわち

$$\Delta^* - \Delta_{\text{HF}} - \text{Re}\Sigma_-(\Delta^*, 0; \Delta^*) = 0 \quad (19)$$

ここで，下向きスピン電子のプロパゲータが

$$S_-(p) = \frac{Z_-(\mathbf{p})}{p_0 - \omega_-(\mathbf{p})} + \dots \quad (20)$$

で表されることに注意しよう。但し $Z_-(\mathbf{p})$ は波動関数のくりこみの平方であり，点々はプロパゲータの不安定状態部分に対応している。ストナー・ギャップの定義から， $\Delta^* = \omega_-(0)$ になることは明らかである。くりこまれた結合定数 λ^* を我々は次の式で定義しよう。

$$\Delta^* = \lambda^* (\langle n_+ \rangle - \langle n_- \rangle) \quad (21)$$

ここで $\langle n_\sigma \rangle$ は σ スピン電子数の統計力学的平均である。ハートリー・フォック状態での(21)に対応する式は

$$\Delta_{\text{HF}} = \lambda (\langle n_+ \rangle_{\text{HF}} - \langle n_- \rangle_{\text{HF}}). \quad (22)$$

である。摂動を受けた状態が完全強磁性状態に留まる限り， $\Delta^* = \lambda^*$ が成立する。なぜならこの状態では $\langle n_+ \rangle = 1, \langle n_- \rangle = 0$ となるからである。スティフネス定数 D は Δ^* と m^* (くりこまれた電子質量) に依存する。逆に Δ^* と m^* は D に依存する。図1には $m^* = m$ とした時の摂動を受けた電子分散が与えられている。図1は運動量の小さい領域で有効質量に顕著な影響がみられるもの，フェルミ運動量に至るまでの広い

運動量領域で分散曲線をながめればその曲率は無摂動の場合とほとんど同じであることを示している。こうしたことから電子質量に対する自己無撞着的取扱いを省略して D を計算しても許されるように思われる。図2には Δ^* と D の自己無撞着性を考慮して求められた有効結合定数が示されている。点線は結節部分補正を無視した最低次の相互作用による結果である。また，実線は結節部分による補正を

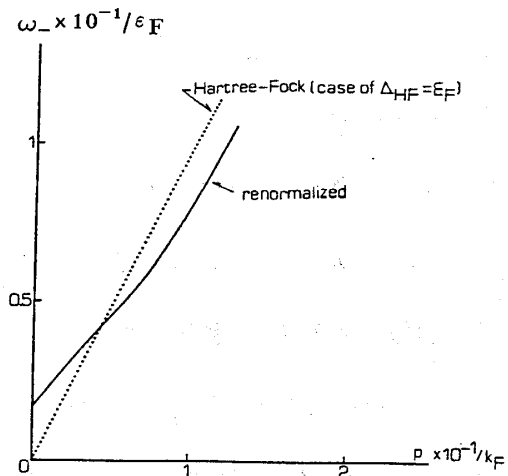


図1 下向きスピン電子の摂動を受けた分散曲線 ($\lambda = 2\varepsilon_F, \Delta = 1.5\varepsilon_F$)

取入れた結果を表している。点線と実線の比較から結節部分によってくりこみ効果が著しく軽減されることがわかる。しかしながら、実線の結果に限っても λ と λ^* の差はかなり大きい。このような結合定数の相互作用によるくりこみはカットオフの増加と共により明確になる。摂動を受けた状態が完全強磁性状態に留まるためには $A = 1.5 k_F$ の時 $\lambda \gtrsim 1.7 \epsilon_F$ となる必要がある。但し ϵ_F はフェルミ・エネルギーを表す。結節部分による補正を無視した場合、対応する不等式は $\lambda \gtrsim 4.2 \epsilon_F$ で与えられる。図 2 は、電子-マグノン相互作用による結合定数のくりこみが用いられた A の値に対して 40~70% 程度であることを示している。

マグノンのプロパゲータは、一般にはスピンの集団運動に対応した部分 (式 (12) に対応) と粒子-正孔対励起に対応したいわゆるストーナー励起部分から構成される。ストーナー励起は比較的高エネルギー・運動量領域に分布しており、完全強磁性のようにストーナー・ギャップの大きい状態でのくりこみ効果はほとんどスピンの集団運動部分に依存している。

参考文献

- 1) P. W. Anderson, Phil. Mag. **24** (1971) 203.
- 2) S. Seki, Prog. Theor. Phys. **62** (1979) 1197.
- 3) J. A. Hertz and D. M. Edwards, J. Phys. F **3** (1973) 2174, 219.

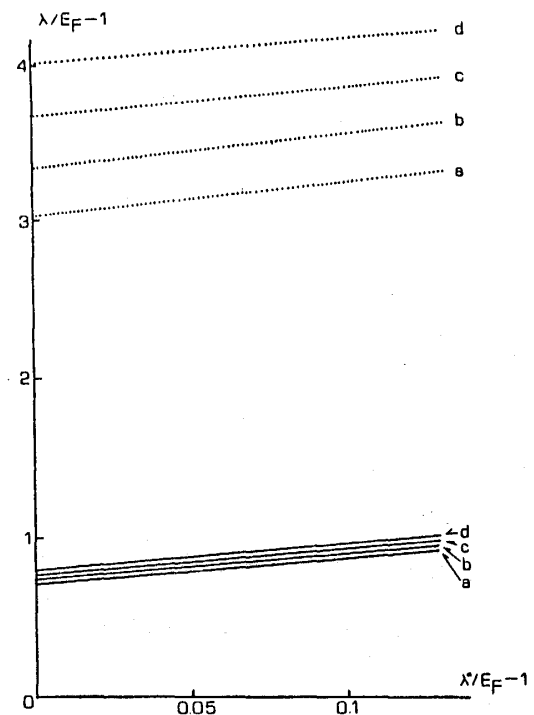


図2 結合定数のくりこみ。点線は最低次の電子-マグノン相互作用効果。曲線 a , b , c , d はそれぞれ $A = 1.4 \epsilon_F$, $1.6 \epsilon_F$, $1.8 \epsilon_F$, $2.0 \epsilon_F$ に対応。